

УДК 669.046:539.37:548.4:548.313

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ПОСТРОЕНИЯ $\gamma$ -ПОВЕРХНОСТЕЙ К ИССЛЕДОВАНИЮ ПЛОСКИХ ДЕФЕКТОВ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ $DO_3$

© М.А. Баранов, В.В. Романенко, М.Д. Старостенков, Е.А. Дубов, Е.В. Черных

Россия, Барнаул, Алтайский государственный технический университет

Baranov M.A., Romanenko V.V., Starostenkov M.D., Dubov E.A., Chernykh E.V. The Application of the gamma-surfaces construction method to the investigation of the planar defects of  $DO_3$  type alloys. Profiles of gamma-surfaces are constructed in  $\{110\}$  and  $\{211\}$  planes for alloys  $Fe_3Al$ ,  $Fe_3Si$  and  $Cu_3Al$  (superstructure  $DO_3$ ). Our results indicate the possibility of pencil sliding evolution especially in the given superstructure.

Макроскопическое проявление пластической деформации определяется в материале во многом элементами, реализуемыми на микроскопическом атомном уровне [1]. Известно, что на процессы упрочнения материалов влияют разнообразные дефекты кристаллического строения, такие, как дефекты упаковки (ДУ), дислокации. Статические дефекты упаковки блокируют дислокации и останавливают процессы пластической деформации; в то же время движущиеся полные дислокации, расщепляясь на частичные, образуют дефекты упаковки, что приводит к упрочнению материала.

Образование дефектов упаковки имитируется относительным сдвигом частей кристалла вдоль плоскости скольжения на некоторый вектор трансляции. Переходу кристалла из одного состояния в другое препятствует определенный энергетический барьер сдвига. В металлах и регулярных твердых растворах эквивалентный сдвиговый дефект упаковки образуется при векторах трансляции  $1/6\langle 111 \rangle$  и  $1/3\langle 111 \rangle$ . В упорядоченных сплавах указанные выше сдвиги реализуют различные по уровням энергии дефекты упаковки, называемые сверхструктурными (СДУ) и комплексными (КДУ) [2]. Одновременно в упорядоченных сплавах сдвиги на  $1/2\langle 111 \rangle$  или  $\langle 100 \rangle$ , в зависимости от типа сверхструктуры, создают особый тип дефекта, называемый антифазной границей (АФГ). В последнее время находит применение в теоретическом анализе (микроскопике) пластической деформации метод построения трехмерного или двухмерного энергетического профиля поверхности сдвига частей кристалла, называемый моделью построения  $\gamma$ -поверхности [4].

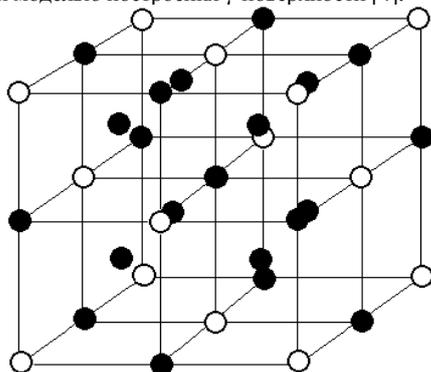


Рис. 1. Элементарная ячейка сверхструктуры  $DO_3$

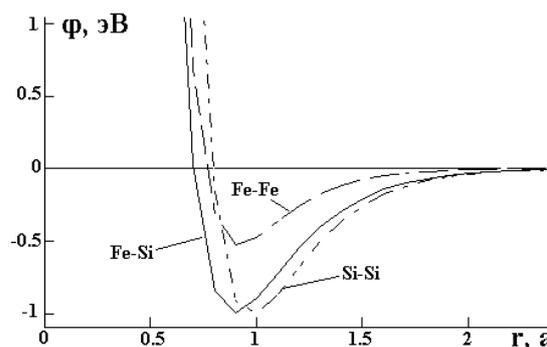


Рис. 2. Потенциальные кривые сплава  $Fe_3Si$

Таблица 1

Параметры межатомных потенциалов Морза исследуемых сплавов

Сплав	Тип взаимодействия	$\alpha$ *a	$\beta$	D, эВ
	Fe-Fe	4,3444	52,6429	0,52875
$Fe_3Al$	Fe-Al	3,5217	29,8173	0,53274
	Al-Al	2,9445	27,8769	0,30638
$Fe_3Si$	Fe-Fe	4,3444	52,6429	0,52875
	Fe-Si	3,6471	25,8430	1,00312
	Si-Si	3,7844	39,6350	1,01629
$Cu_3Al$	Cu-Cu	3,8409	40,7760	0,37498
	Cu-Al	3,2351	28,0130	0,35143
	Al-Al	2,9445	27,876990	0,30638

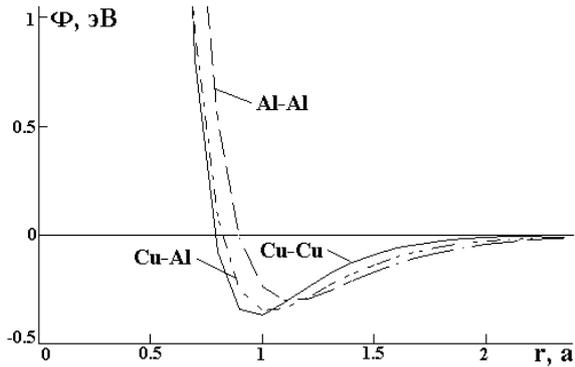


Рис. 3. Потенциальные кривые сплава  $\text{Cu}_3\text{Al}$

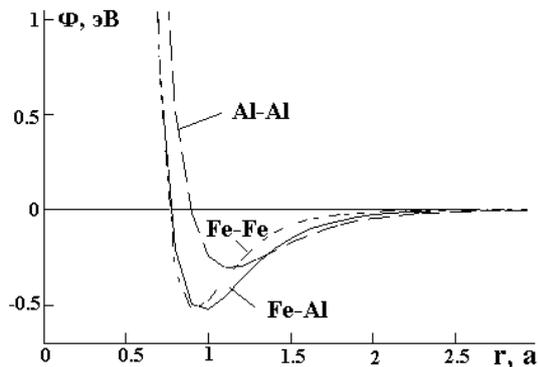


Рис. 4. Потенциальные кривые сплава  $\text{Fe}_3\text{Al}$

В настоящей работе профили  $\gamma$ -поверхностей построены в зоне сдвига  $\langle 111 \rangle$  для материалов, упорядоченных по типу  $\text{DO}_3$ . Данная сверхструктура включает в себя следующие сплавы:  $\text{Fe}_3\text{Al}$ ,  $\text{Fe}_3\text{Si}$ ,  $\text{Cu}_3\text{Al}$  и др., многие из которых широко применяются в электротехнике и приборостроении в качестве материалов для изготовления деталей, требующих высоких прочностных свойств. Кроме того, эти материалы применяются в магнитострикционных преобразователях ультразвуковой и гидроакустической аппаратуры для изготовления трансформаторов с крайне низкими электромагнитными и шумовыми потерями.

Кристаллическая решетка сверхструктуры  $\text{DO}_3$  может быть представлена набором из четырех гранецентрированных кубических (ГЦК) подрешеток, вложенных друг в друга и сдвинутых на четверть главной диагонали куба (рис. 1). Одна подрешетка заполнена атомами сорта А, оставшиеся три – атомами сорта В. Параметр решетки данной сверхструктуры равен удвоенному периоду ОЦК-решетки. Стехиометрическая формула  $\text{AB}_3$  [3].

Для описания свойств сплавов сверхструктуры  $\text{DO}_3$  конструировались потенциалы, заданные функцией Морза  $\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} (\beta e^{-\alpha r_{ij}} - 2)$  с обрезанием между третьей и четвертой координационными сферами.  $D$ ,  $\beta$ ,  $\alpha$  – параметры потенциальной функции,  $r_{ij}$  – радиус координационной сферы. Использован традиционный подход к решению проблемы построения функции взаимодействия – представление энергии связи кристалла в расчете на ячейку в виде суммы парных межатомных взаимодействий по узлам решетки [4]. Параметры потенциалов, связывающие атомы одного сорта, определялись из свойств чистых металлов:

энергии связи, параметра решетки, модуля всестороннего сжатия. Параметры потенциалов, описывающие межатомные связи в сплавах – на основе соответствия рассчитанных характеристик сплава их экспериментальным значениям. В качестве таких характеристик могут быть использованы теплота смещения, энергии образования некоторых дефектов. В результате последовательного перебора удалось построить наборы потенциалов Морза, описывающие межатомные взаимодействия в сплавах, параметры которых сведены в табл. 1.

Вид потенциальных кривых представлен на рис. 2, 3 и 4 ( $r$  дано в параметрах решетки).

Процедура расчета потенциального рельефа следующая.

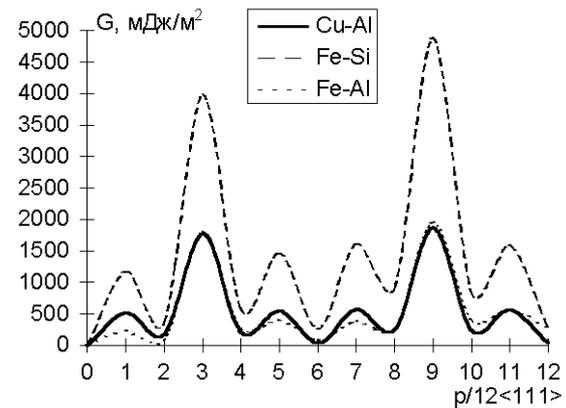


Рис. 5. Профиль  $\gamma$ -поверхности для сплавов  $\text{Cu}_3\text{Al}$ ,  $\text{Fe}_3\text{Si}$ ,  $\text{Fe}_3\text{Al}$  сверхструктуры  $\text{DO}_3$  в плоскости  $\{110\}$ . Направление вектора сдвига  $\langle 111 \rangle$

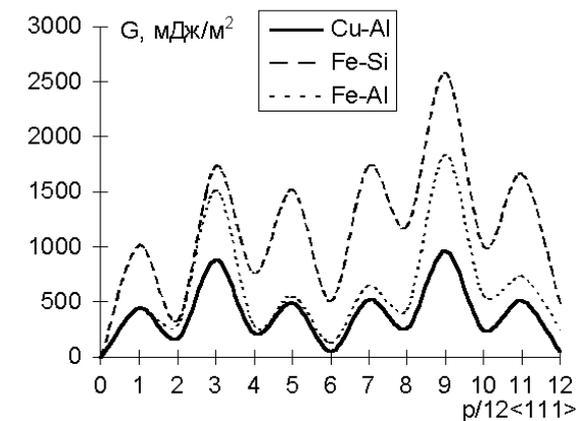


Рис. 6. Профиль  $\gamma$ -поверхности для сплавов  $\text{Cu}_3\text{Al}$ ,  $\text{Fe}_3\text{Si}$ ,  $\text{Fe}_3\text{Al}$  сверхструктуры  $\text{DO}_3$  в плоскости  $\{211\}$ . Направление вектора сдвига  $\langle 111 \rangle$

В блоке кристалла производится сдвиг частей кристалла на некоторый малый вектор  $\vec{p} \langle 111 \rangle$ , затем включается релаксация в приграничной области кристалла путем поиска максимума внутренней энергии относительно произвольных смещений атомов при условии фиксирования сдвига на внешних границах кристаллита. В противном случае сдвиг за счет релаксации атомов исчезнет полностью. Положения сдвигов фиксировались через  $1/12 \langle 111 \rangle$ .

На рисунке 5 приведен двухмерный разрез  $\gamma$ -поверхности в плоскостях типа  $\{110\}$ .

Сдвиг на  $1/6\langle 111 \rangle$  характеризуется первым локальным минимумом энергии на кривой, соответствующим сверхструктурному дефекту упаковки («чистому» дефекту упаковки (СДУ)). Следующий этап сдвига требует больших затрат энергии на преодоление потенциального барьера. Положение  $1/3\langle 111 \rangle$  соответствует уровню энергии комплексного дефекта упаковки (КДУ I), состоящего из дефекта упаковки и АФГ I. Затем потенциальный барьер сдвига вновь понижается. Следующий минимум, самый глубокий, соответствует состоянию одиночной АФГ типа  $1/6\langle 111 \rangle \{110\}$ . Сдвиг  $2/3\langle 111 \rangle \{110\}$  соответствует образованию КДУ II типа (КДУ II) с более высоким уровнем энергии, нежели КДУ I. Затем следует максимальный потенциальный барьер, и при сдвиге на  $5/6\langle 111 \rangle \{110\}$  кристалл попадает в состояние КДУ III типа (КДУ III), который состоит из СДУ и АФГ II типа  $\langle 111 \rangle \{110\}$ . В рамках предлагаемой модели энергия образования возрастает от СДУ до КДУ II и несколько падает в состоянии КДУ III. Различия в энергиях образования КДУ можно прокомментировать тем, что при образовании КДУ I на СДУ накладывается АФГ I, при образовании КДУ III на СДУ накладывается АФГ II, а при образовании КДУ II на СДУ накладывается плоский дефект, соответствующий некоему переходному состоянию из АФГ I в АФГ II.

Для трех исследуемых сплавов наиболее высокие уровни потенциальных барьеров наблюдаются для системы Fe – Si, значительно ниже они в системах Fe – Al и Cu – Al.

Рисунок 6 демонстрирует  $\gamma$ -поверхности для исследуемых сплавов в плоскостях  $\{211\}$ , который повторяет все особенности, отмеченные при описании энергетических профилей в плоскостях  $\{110\}$ , энергетические барьеры сдвигу значительно снижаются ( $\sim$  в 2 раза), и при этом возрастают энергии образования ДУ и АФГ ( $\sim$  в 2 раза).

Во всех рассмотренных системах скольжения наблюдаются близкие по форме профили  $\gamma$ -поверхностей. Данный факт подтверждает возможность реализации механизма карандашного скольжения в сверхструктуре  $DO_3$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Физическое металловедение / Под ред. Р. Кана. М.: Мир, 1968. С. 9-79.
2. Старостенков М.Д., Горлов Н.В. // ФММ. 1989. Т. 67. № 2. С. 249-257.
3. Фридель Дж. Дислокации. М.: Мир, 1967. 643 с.
4. Кристьян Дж. Теория превращения в металлах и сплавах. М.: Мир, 1978. 972 с.
5. Старостенков М.Д., Баранов М.А. // Изв. вузов. Черная металлургия. 1990. № 4. С. 54, 55.